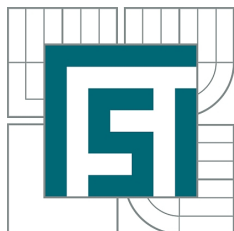


VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV MATEMATIKY
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF MATHEMATICS

ŘEŠENÍ PROSTOROVÉ ÚHLOVÉ DISTRIBUCE VLÁKNOVÝCH ČÁSTIC POMOCÍ FOKKER-PLANCK ROVNICE PRO LAMINÁRNÍ PROUDĚNÍ

SOLUTION OF SPACE ORIENTATION DISTRIBUTION OF FIBER PARTICLES BY MEANS OF
FOKKER-PLANCK EQUATION FOR LAMINAR FLOW

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE
BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

JAN KARKULÍK

VEDOUcí PRÁCE
SUPERVISOR

prof. Ing. MIROSLAV JÍCHA, CSc.

BRNO 2014

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav matematiky

Akademický rok: 2013/2014

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

student(ka): Jan Karkulík

který/která studuje v **bakalářském studijním programu**

obor: **Matematické inženýrství (3901R021)**

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Řešení prostorové úhlové distribuce vláknových částic pomocí Fokker-Planck rovnice pro laminární proudění

v anglickém jazyce:

Solution of space orientation distribution of fiber particles by means of Fokker-Planck equation for laminar flow

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Zvolit postup řešení tzv. orientation distribution function pro nekulové částice (vlákna) v obecném smykovém proudění typické pro laminární proudění v jednoduché kruhové trubce.

Cíle bakalářské práce:

1. Transformace z globálního do lokálního souřadného systému
2. Identifikace rotační rychlosti částic
3. Postup řešení Fokker-Planck rovnice pro Orientation distribution function

Seznam odborné literatury:

E. M. KRUSHKAL AND ISAIAH GALLILY, On the Orientation Distribution Function of Nonspherical Aerosol

Particles in a General Shear Flow, I. The laminar Case, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 99, No. 1, May 1984

Vedoucí bakalářské práce: prof. Ing. Miroslav Jícha, CSc.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2013/2014.

V Brně, dne 22.11.2013

L.S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
Ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
Děkan fakulty

Abstrakt

Tato bakalářská práce má za úkol představit matematický model prostorové úhlové distribuce pro vláknovité částice aerosolové suspenze. Je uvažován vliv laminárního proudění a Brownova pohybu, což odpovídá advekčně-difuzivnímu modelu známému jako Fokker-Planckova rovnice. K nalezení řešení této parciální diferenciální rovnice je zvolena metoda poruchové řady. Přibližné řešení obdržíme ve tvaru konečné řady sférických harmonik.

Summary

This bachelor thesis presents mathematical model of spatial orientation distribution for fiber particles in aerosol suspension. The influence of laminar flow and Brownian motion is considered. This corresponds with the advection-diffusion model known as Fokker-Planck equation. Perturbation series is used to determine the solution of this partial differential equation. The approximate solution is obtained as a finite series of spherical harmonics.

Klíčová slova

Úhlová distribuce, elipsoid, laminární proudění, rotační Brownův pohyb, Fokker-Planckova rovnice, sférické harmoniky, poruchová řada.

Keywords

Orientation distribution, ellipsoid, laminar flow, rotational Brownian motion, Fokker-Planck equation, spherical harmonics, perturbation series.

KARKULÍK, J. *Řešení prostorové úhlové distribuce vláknových částic pomocí Fokker-Planck rovnice pro laminární proudění*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2014. 21 s. Vedoucí bakalářské práce prof. Ing. Miroslav Jícha, CSc.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci *Řešení prostorové úhlové distribuce vláknových částic pomocí Fokker-Planck rovnice pro laminární proudění* vypracoval samostatně pod vedením prof. Ing. Miroslava Jíchy, CSc. s použitím materiálů uvedených v seznamu literatury.

Jan Karkulík

Chtěl bych poděkovat prof. Ing. Miroslavu Jíchovi, CSc. za příležitost zpracovat tuto práci pod jeho vedením.

Jan Karkulík

Obsah

Úvod	2
1 Částice v laminárním proudění	3
1.1 Transformovaný souřadný systém	3
1.2 Úhlové rychlosti	5
1.3 Rotační Brownův pohyb	6
2 Advekčně-difuzivní rovnice	7
2.1 Advekce a difuze	7
2.2 Fokker-Planckova rovnice	9
3 Řešení pro ustálený stav	10
3.1 Metoda poruchové řady	11
3.2 Výpočet pro $\sigma < 1$	13
3.3 Výpočet pro $\sigma > 1$	16
4 Interpretace výsledků	17
4.1 Řešení pro $\sigma > 1$	17
4.2 Řešení pro $\sigma < 1$	19
Závěr	20
Literatura	21

Úvod

Matematicky popsat pohyb pevné částice, který vznikne vlivem proudění kapaliny tak, aby odpovídal realitě, je obecně dost obtížná úloha. Abychom se dobrali alespoň nějakých výsledků, je nutné uvažovat jednoduchý typ proudění a jednoduchý tvar částice. Pro částici tvaru rotačně symetrického elipsoidu v laminárním proudění se podařilo již na začátku 20. století odvodit velice přesné pohybové rovnice. Při dostatečně malých vzdálenostech se však reálná kapalina přestává chovat jako kontinuum. V modelu pro malé částice, kterým se tato práce zabývá, je tedy nutné zohlednit náhodné nárazy molekul kapaliny.

Naším cílem je tedy analyzovat rotační pohyb nesférické částice, který vznikne společným působením proudění a Brownova pohybu molekul kapaliny. Touto kombinací deterministického a stochastického vlivu vznikne výsledný model stochastického charakteru, jehož cílem bude nalézt pro dané proudění nejpravděpodobnější prostorovou orientaci částice.

Kapitola 1

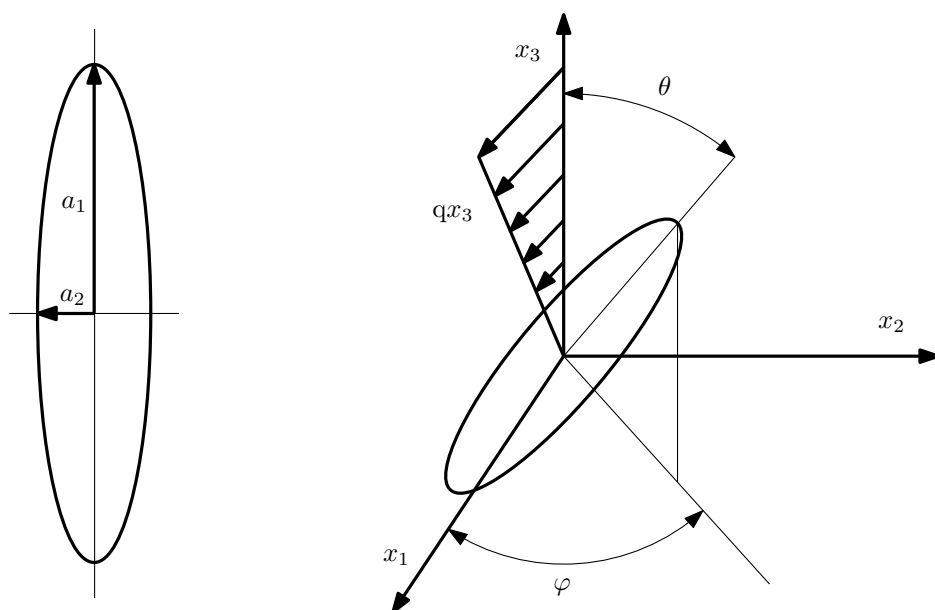
Částice v laminárním proudění

Nejprve specifikujme částici a proudění, které budeme studovat. Velikost částice je v řádu mikrometrů a je tvaru podlouhlého vlákna. Pro zjednodušení budeme tuto částici považovat za dokonale tuhou a nehmotnou. Vzhledem k malým rozměrům této částice se tak nedopustíme velkého prohřešku. Geometrií částice je válec, který je v průměru zhruba desetkrát menší než je jeho délka. Válec ale z početních důvodů nahradíme podlouhlým rotačním elipsoidem.

Pokud jde o parametry laminárního proudění, budeme uvažovat dynamickou viskozitou kapaliny η a rychlostní gradient $\mathbf{G}(\mathbf{x})$. Částice rotuje vlivem gradientu rychlostního profilu a díky svým mikroskopickým rozměrům je ovlivněna také náhodnými nárazy molekul kapaliny. Kombinace těchto dvou zcela odlišných mechanismů činí hledání pohybové rovnice částice komplikovanější úlohou.

1.1 Transformovaný souřadný systém

Orientace elipsoidu v prostoru je znázorněna na obrázku 1.1. Pro poloosy elipsoidu platí $a_1 > a_2 = a_3$. Jedná se tedy o rotační elipsoid. Byl zvolen sférický souřadný systém.



Obrázek 1.1: Elipsoid ve sférickém souřadném systému, v rovině x_1x_3 leží rychlostní profil

Cílem první části této práce je najít rovnice pro časové změny úhlů θ a φ , které jsou způsobeny čistě rychlostním gradientem laminárního proudění, tedy bez vlivu Brownowského pohybu molekul.

Rychlosti rotací způsobené vlivem laminárního proudění odvodil pro rotačně symetrické elipsoidy Jeffery [1]. Jeho postup ovšem vyžaduje sledovat vliv proudění z lokálního souřadného systému, který je jakoby připnutý na rotující částici. Lokální souřadný systém nazveme x'_i . Vypočteme matici přechodu \mathbf{A} mezi systémem x_i a x'_i . Matice \mathbf{A} vznikne součinem matic rotací kolem příslušných souřadných os systému x_i a x'_i .

$$\mathbf{A} = \mathbf{BCD} = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Matice \mathbf{D} udává rotaci o úhel φ kolem osy x_3 , matice \mathbf{C} udává rotaci o úhel θ kolem osy x'_1 a matice \mathbf{B} udává rotaci o úhel ψ kolem osy x'_3 .

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi & \cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi & \sin \psi \sin \theta \\ -\sin \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi & -\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi & \cos \psi \sin \theta \\ \sin \theta \sin \varphi & -\sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Rychlostní profil proudění je obecně vektorové pole:

$$\mathbf{u} = (u_1(x_1, x_2, x_3), u_2(x_1, x_2, x_3), u_3(x_1, x_2, x_3))$$

Tenzor rychlostního gradientu $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ definujeme následovně:

$$G_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad V_{ij} = G_{ij} - G_{ji} \quad S_{ij} = G_{ij} + G_{ji} \quad (1.2)$$

$$b = \frac{a_1^2 - a_2^2}{a_1^2 + a_2^2} \quad (1.3)$$

\mathbf{G} je tedy matice 3x3, V_{ij} je vorticity profilu, S_{ij} je smykové napětí v kapalině, b je koeficient vyjadřující poměr poloos elipsoidu.

V dalším provedeme transformaci tenzoru rychlostního gradientu \mathbf{G} do souřadného systému x'_i . Vztah (1.4) vyplývá z vlastnosti násobení matic. Jelikož \mathbf{A} je produktem ortogonálních matic, je tedy sama ortogonální maticí, platí tedy $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$. Tento postup transformace tenzoru je dohledatelný v [2] nebo v jakékoliv literatuře z oblasti tenzorové analýzy.

$$\mathbf{G}' = \mathbf{AGA}^T \quad G'_{ij} = \frac{\partial u'_i}{\partial x'_j} = A_{ik} A_{jl} G_{kl} \quad \text{kde } i, j, k, l \in \{1, 2, 3\} \quad (1.4)$$

Jednotlivé složky matice G'_{ij} získáme fixováním indexů i, j a sumací přes indexy k, l . Díky linearitě této transformace pro transformovanou vorticitu a smyková napětí platí:

$$V'_{ij} = G'_{ij} - G'_{ji} \quad S'_{ij} = G'_{ij} + G'_{ji}$$

1.2 Úhlové rychlosti

Pro popis rotace tělesa využijeme Eulerových úhlů. Nechť tedy θ , φ , ψ jsou Eulerovy úhly. Rotace tělesa kolem jeho vlastních os je dána vektorem $\boldsymbol{\omega}$:

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \sin \psi \cos \theta + \dot{\theta} \cos \psi \\ \dot{\varphi} \cos \psi \sin \theta - \dot{\theta} \sin \psi \\ \dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi} \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

Za použití matematického aparátu (1.4) z předchozí části můžeme uvést Jefferyho [1] pohybové rovnice elipsoidu. Pro vektor úhlových rychlostí $\boldsymbol{\omega}$ platí:

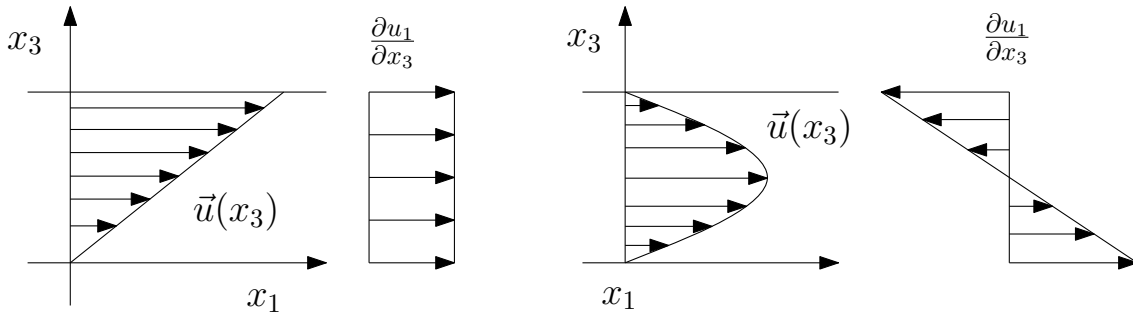
$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} V'_{32} + bS'_{32} \\ V'_{31} + bS'_{31} \\ V'_{21} + bS'_{21} \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

Položením do rovnosti (1.5) a (1.6) získáme rovnice, ze kterých lze vyjádřit $\dot{\theta}$ a $\dot{\varphi}$. Všimněme si, že úhel ψ vyjadřuje natočení částice kolem její nejdelší poloosy a_1 . Tento úhel je pro naše účely zcela bezvýznamný, proto tento jej a jeho časovou změnu zanedbáme. Výpočet se tím značně zjednoduší. Po úpravách dostáváme hledané rovnice úhlových rychlostí. [2]

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \frac{1}{2} \{ [(V_{21} + bS_{21}) \cos \varphi + (V_{31} + bS_{31}) \sin \varphi] \cos^2 \theta - \\ &\quad - [(V_{12} + bS_{12}) \cos \varphi + (V_{13} + bS_{13}) \sin \varphi] \sin^2 \theta \} + \\ &\quad + \frac{b}{4} [G_{22} + G_{33} - 2G_{11} + (G_{22} - G_{33}) \cos \varphi + S_{32} \sin 2\varphi] \\ \dot{\varphi} &= \frac{1}{2} V_{32} + \cotg \theta \{ [(V_{31} + bS_{31}) \cos \varphi - (V_{21} + bS_{21}) \sin \varphi] + \\ &\quad + b[S_{32} \cos 2\varphi - (G_{22} - G_{33}) \sin 2\varphi] \} \end{aligned} \quad (1.7)$$

Výše uvedené vzorce platí pro obecný tenzor $\mathbf{G}(\mathbf{x})$. V této práci se omezíme pouze na jednodušší typ proudění. Pro Couettovo proudění $\vec{u} = (qx_3, 0, 0)$ je gradient rychlosti konstantní a jeho jediná nenulová složka je $G_{13} = q$. Tento případ byl studován například v [3]. Pro parabolický průběh rychlostního profilu vyskytujícího se například ve válcovém potrubí bude rychlostní gradient závislý na radiální vzdálenosti od středu válce. Znázorněno na obrázku 1.2.

Pro Couettovo proudění jsou rovnice rychlostí (1.8) a (1.9) o poznání jednodušší. Všimněme si, že ačkoliv se jedná o dvojrozměrný rychlostní profil, částice bude rotovat prostorově. V závislosti na počáteční orientaci, gradientu a koeficientu b (1.3) se rotační pohyb částice časem ustálí na určité oběžné dráze. Tento fenomén je se nazývá Jefferyho orbit a je detailněji rozebrán v [1].



Obrázek 1.2: Couettův profil $\vec{u} = (qx_3, 0, 0)$ s konstantním gradientem a parabolický profil $\vec{u} = (-(x_3 - r)^2 + v_{max}, 0, 0)$ s lineárním gradientem, r je poloměr trubky, v_{max} je maximální rychlost profilu.

$$\dot{\theta} = \frac{qb}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \quad (1.8)$$

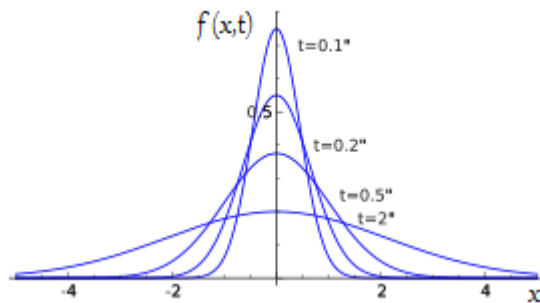
$$\dot{\varphi} = \frac{q}{2} \sin \theta (1 + b \cos 2\varphi) \quad (1.9)$$

1.3 Rotační Brownův pohyb

Testovaná částice vlivem Brownova pohybu nahodile mění polohu. Ačkoliv molekuly média jsou zhruba o 10^{-3} m menší, není jejich vliv zcela zanedbatelný. Matematicky tento proces odpovídá rovnici difuze (1.10). Uvedené řešení je pro jednorozměrný případ.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (1.10)$$

Funkce $f(x, t)$ vyjadřuje pravděpodobnost nalezení částice v čase t v místě x , pod proměnou x si můžeme představit i úhel otočení. D je difuzivní koeficient. Vidíme, že veličina $f(x, t)$ má normální rozdělení pravděpodobnosti. Střední hodnota rozdělení $E(f) = 0$ je nezávislá na čase t . Můžeme to chápat tak, že nejpravděpodobněji nalezneme částici tam, kde jsme ji v $t = 0$ umístili. Rozptyl $S(f) = 2Dt$ se naopak s časem zvětšuje. Znázorněno na obrázku 1.3.



Obrázek 1.3: Hustota pravděpodobnosti výskytu částice v čase t a místě x

Kapitola 2

Advekčně-difuzivní rovnice

Z předchozí kapitoly vyplývá, že požadujeme, aby výsledný matematický model zohlednil deterministické i stochastické vlastnosti tohoto fyzikálního systému. Znamená to tedy, že model bude stochastický. Tato kapitola je věnována odvození stochastické diferenciální rovnice, jejímž řešením bude funkce $F(\theta, \varphi, t)$. Tato spojitá funkce vyjadřuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částice natočenou o úhly θ, φ v čase t .

2.1 Advekce a difuze

Vysypeme-li do řeky velké množství malých částic, přirozeně se ve vodě rozptýlí a budou cestovat ve směru toku řeky. Jako celek ovšem nebudou zaujímat stejný tvar, jako by byly uvnitř pytle. Transport částic vlivem proudění se nazývá advekce. Uvažujme tedy rychlostní pole \mathbf{u} a skalární funkci $\rho(\mathbf{x}, t)$, která představuje koncentraci částic v místě \mathbf{x} a čase t . Pro konstantní počet částic platí rovnice kontinuity (2.1).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\rho) = 0 \quad \frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\omega}F) = 0 \quad (2.1)$$

Pro naše účely tuto rovnici modifikujeme pro rotační pohyb. Uvažujeme rychlostní pole $\boldsymbol{\omega} = (\dot{\theta}, \dot{\varphi})$ a funkci koncentrace $F(\theta, \varphi, t)$.

Nyní uvažujme podobnou situaci. Do nádoby s vodou nasypeme malé částice. Částice se uvnitř nádoby postupem času rozmístí po celém jejím objemu, ačkoliv v kapalině není proudění. Tento jev se nazývá difuze. Pro difuzní tok částic J přes jednotku plochy platí první Fickův zákon (2.2). $\rho(x, t)$ je koncentrace částic v místě x , D je koeficient difuzivity daného média. Ve vyšších dimenzích je tok \mathbf{J} roven gradientu $\rho(\mathbf{x}, t)$.

$$J = -D \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad \mathbf{J} = -D \nabla \rho \quad (2.2)$$

Ze zákona zachování hmoty lze vyvodit, že pro časovou změnu $\rho(x, t)$ platí:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) = 0$$

Tento vztah se často nazývá druhý Fickův zákon. Je analogií rovnice difuze, která je známá také jako rovnice vedení tepla. Funkci $\rho(x, t)$ opět nahradíme funkcí $F(\theta, \varphi, t)$. Hovoříme-li o Brownově pohybu, $F(\theta, \varphi, t)$ má význam hustoty pravděpodobnosti. Pokud je D konstantou, pro vícerozměrný případ dostaneme:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla F) = D \nabla^2 F$$

V reálné kapalině zpravidla probíhá advekce i difuze zároveň. Avšak jeden mechanismus může mít větší vliv na tok částic více než ten druhý. Poměr vlivu advekce a difuze na tok vyjadřuje Pecletovo číslo σ .

$$\sigma = \frac{\text{advekční tok}}{\text{difuzní tok}} \quad \sigma_{rot} = \frac{G_0}{D_0} \quad (2.3)$$

Pro zavedení rotačního Pecletova čísla σ_{rot} bude nutné určit rotační difuzivní koeficient D_0 a charakteristický rychlostní gradient G_0 . Koeficient D_0 závisí na tvaru částice. Pro válcové částice byl odvozen vztah (2.4) [4].

$$D_0 = \frac{3kT}{2\pi\mu d^3} \frac{(2p^2 - 1) \ln[p + \sqrt{p^2 - 1} - p\sqrt{p^2 - 1}]}{(p^4 - 1)\sqrt{p^2 - 1}} \quad (2.4)$$

T ... termodynamická teplota μ ... kinematická viskozita média
k ... Boltzmannova konstanta p ... poměr délky a průměru $p = \frac{l}{d} > 1$
d ... průměr válce

Dostatečně dlouhý válec je možné nahradit rotačním elipsoidem. Pro ekvivalentní elipsoid byl odvozen vztah (2.5) [3].

$$D_0 = \frac{3kT}{4\pi\mu a_1 a_2^2} \frac{p^2}{p^4 - 1} \left[-1 + \frac{2p^2 - 1}{2p\sqrt{p^2 - 1}} \ln \frac{p + \sqrt{p^2 - 1}}{p - \sqrt{p^2 - 1}} \right] \quad (2.5)$$

a_1, a_2 ... poloosy elipsoidu p ... poměr poloos $p = \frac{a_1}{a_2} > 1$

Advekční koeficient nebo-li charakteristický gradient G_0 je příslušná složka rychlostního gradientu \mathbf{G} . Pokud budeme zkoumat proudění pouze ve směru osy x_1 potom G_0 bude obecně vektor, jehož složky budou všechny nenulové derivace $\frac{\partial u_i}{\partial x_1}$. My se ale zaměříme na jednodušší typ proudění, kde jedinou nenulovou složkou tohoto vektoru bude konstanta q , případně lineární funkce $q(x)$. Pro Couettův profil, kde $G_{13} = q$ viz.(1.1) dostáváme:

$$G_0 = q \quad , q \in \mathbb{R} \quad (2.6)$$

Po shrnutí základních znalostí o advekci a difuzi zbývá jen skloubit je v jednu rovnici. Opět vyjdeme z rovnice kontinuity. Definujeme celkový tok \mathbf{j} jako součet advekčního a difuzního toku.

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad \mathbf{j} = \mathbf{j}_{adv} + \mathbf{j}_{dif}$$

Z rovnic (2.1) a (2.2) dosadíme za \mathbf{j} :

$$\mathbf{j}_{adv} = \mathbf{u}\rho \quad \mathbf{j}_{dif} = -D\nabla\rho \quad (2.7)$$

Dosazením (2.7) zpět do rovnice kontinuity dostáváme advekčně-difuzivní rovnici, známou pod jménem Fokker-Planckova rovnice.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\rho - D\nabla\rho) = 0 \quad (2.8)$$

2.2 Fokker-Planckova rovnice

Obdobně jako v předchozím upravíme rovnici (2.8) tak, aby odpovídala modelu úhlové orientace. Dosazením za $\mathbf{u} = \boldsymbol{\omega} = (\dot{\theta}, \dot{\varphi})$ a za $\rho = F(\theta, \varphi)$ do (2.7) dostáváme Fokker-Planckovu rovnici pro rotační pohyb.

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\omega} F = D \nabla^2 F \quad (2.9)$$

Na začátku tohoto textu jsme zavedli sférický souřadný systém. Pro pořádek si jej připomeneme.

$$\begin{aligned} x_1 &= r \sin \theta \cos \varphi & x_3 &= r \cos \theta \\ x_2 &= r \sin \theta \sin \varphi & J &= r^2 \sin \theta \end{aligned}$$

Jelikož se zajímáme o úhlovou orientaci, položíme $r = 1$. Jakobián transformace je $J = \sin \theta$. Funkce $F(\theta, \varphi, t)$ je hustota pravděpodobnosti spojitého náhodného vektoru $[\theta, \varphi]$, požadujeme tedy aby integrál přes celý definiční obor Ω byl roven jedné.

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi F d\Omega = 1 \quad \text{kde} \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi, \quad \Omega = \{[\theta, \varphi] : \theta \in \langle 0, \pi \rangle, \varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle\} \quad (2.10)$$

Významného zjednodušení dosáhneme, nerozlišujeme-li "příd" a "zád" zkoumané částice. V krajních úhlech tedy platí tyto rovnosti.

$$\begin{aligned} F(\theta, \varphi) &= F(\pi - \theta, \varphi + \pi) \\ F(\theta, \varphi) &= F(\pi - \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Dále připomeneme operátor divergence $\nabla \cdot$ a Laplaceův operátor ∇^2 ve sférických souřadnicích.

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\dot{\theta} \sin \theta) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \dot{\varphi}}{\partial \varphi} \quad (2.12)$$

$$\nabla^2 F = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \quad (2.13)$$

S ohledem na (2.12) a (2.13) přejde rovnice (2.9) do tohoto tvaru:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (F \dot{\theta} \sin \theta) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial F \dot{\varphi}}{\partial \varphi} = D \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \right] \quad (2.14)$$

Kapitola 3

Řešení pro ustálený stav

Z fyzikálních poznatků je známo, že hustota pravděpodobnosti orientace F se časem ustálí, tedy $\frac{\partial F}{\partial t} = 0$ pro $t \rightarrow \infty$. Ve skutečnosti se částice ustálí jen za několik vteřin. Informace o ustáleném stavu je z hlediska aplikací užitečnější než časový vývoj systému. Řešení Fokker-Planckovy rovnice bude nalezeno pro proudění s jednou nenulovou složkou gradientu rychlosti \mathbf{G} . Budeme uvažovat malé Rotační Pecletovo číslo σ_{rot} , dále jen σ .

$$\sigma = \frac{G_0}{D_0} = \frac{q}{D} \ll 1 \quad (3.1)$$

Zjednodušením rovnice (2.14) dostaneme:

$$\dot{\theta} \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{\dot{\varphi}}{\sin \theta} \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (\dot{\theta} \sin \theta) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \dot{\varphi} \right] F = D \nabla^2 F \quad (3.2)$$

Dosadíme za $\dot{\theta}$ a $\dot{\varphi}$ podle (1.8) a (1.9). Spočteme parciální derivace.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} (\dot{\theta} \sin \theta) &= \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{qb}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \sin \theta \right) = \frac{qb}{4} \sin 2\varphi (\cos \theta \sin 2\theta + 2 \sin \theta \cos 2\theta) = \\ &= 2 \sin \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \frac{qb}{4} \sin 2\varphi \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \dot{\varphi} &= \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{q}{2} \sin \theta (1 + b \cos 2\varphi) \right] = \sin \theta (-qb \sin 2\varphi) \end{aligned}$$

Dalšími úpravami dostaneme:

$$\frac{1}{\sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (\dot{\theta} \sin \theta) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \dot{\varphi} \right] = \frac{qb}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \sin 2\varphi - qb \sin 2\varphi = -\frac{qb}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi$$

Rovnice (3.2) tedy nabývá svého finálního tvaru:

$$\begin{aligned} \frac{qb}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{q}{2} (1 + b \cos 2\varphi) \frac{\partial F}{\partial \varphi} - \frac{qb}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi F &= D \nabla^2 F \\ q \left[\frac{b}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{1}{2} (1 + b \cos 2\varphi) \frac{\partial F}{\partial \varphi} - \frac{b}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi F \right] &= \frac{q}{\sigma} \nabla^2 F \Big/ \cdot \frac{\sigma}{q} \\ \sigma \left[\frac{b}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{1}{2} (1 + b \cos 2\varphi) \frac{\partial F}{\partial \varphi} - \frac{b}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi F \right] &= \nabla^2 F \end{aligned} \quad (3.3)$$

3.1 Metoda poruchové řady

Zaměříme se na případ, kdy Pecletovo číslo σ (3.1) je malé, což je typické pro turbulentní proudění. Pro ustálený stav je možné najít funkci $F(\theta, \varphi)$ jako součet analytického řešení F_0 a poruchových řešení $\sigma F_1 + \sigma^2 F_2 + \dots$. Tato mocninná řada se nazývá poruchová řada. Jelikož je $\sigma \ll 1$, bude sloužit jako poruchový koeficient. Tato metoda řešení je popsána v [5].

$$F(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^n F_n(\theta, \varphi) \quad (3.4)$$

Pro další kroky je nutné převést rovnici (3.3) do operátorového tvaru. Levou stranu rovnice (3.3) definujeme jako diferenciální operátor L .

$$L = \frac{b}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} (1 + b \cos 2\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{b}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi \quad (3.5)$$

Je zřejmé, že diferenciální operátor L je lineární. Tedy platí homogenita a aditivita.

$$L\{\lambda F\} = \lambda L\{F\} \quad L\{F_1 + F_2\} = L\{F_1\} + L\{F_2\}, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Díky těmto vlastnostem zapíšeme rovnici (3.3) v operátorovém tvaru:

$$\sigma L\{F\} = \nabla^2 \{F\} \quad (3.6)$$

Vložme F ve tvaru mocninné řady do (3.6) a vypišme prvních pár členů.

$$\begin{aligned} \sigma L \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^n F_n \right\} &= \nabla^2 \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^n F_n \right\} \\ \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^{n+1} L\{F_n\} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^n \nabla^2 F_n \\ 0 + \sigma L\{F_0\} + \sigma^2 L\{F_1\} + \dots &= \nabla^2 F_0 + \sigma \nabla^2 F_1 + \sigma^2 \nabla^2 F_2 + \dots \\ \sigma^0 : \quad 0 &= \nabla^2 F_0 \\ \sigma^1 : \quad L\{F_0\} &= \nabla^2 F_1 \\ \sigma^2 : \quad L\{F_1\} &= \nabla^2 F_2 \end{aligned}$$

Získali jsme tedy tyto relace:

$$\begin{aligned} \nabla^2 F_0 &= 0 \\ L\{F_{n-1}\} &= \nabla^2 F_n \end{aligned} \quad (3.7)$$

Vidíme, že je nezbytné určit nultý člen F_0 , udělejme proto malou odbočku do teorie. Na pravé straně rovnice (3.3) vystupuje Laplaceův operátor. Je známo, že diferenciální operátor ∇^2 má vlastní hodnoty λ a k nim příslušné vlastní funkce ψ , pro které platí:

$$\nabla^2 \psi = \lambda \psi \quad \text{kde } \lambda \in \mathbb{R}, \psi \in L_2(\Omega) \quad (3.8)$$

Vlastními funkcemi Laplaceova operátoru jsou přidružené Legendrovy polynomy $P_l^m(x)$. Pro naše účely zavedeme parametrizaci $x = \cos \theta$. Polynomy $P_l^m(\cos \theta)$ tvoří ortogonální bázi prostoru $L_2(\cos \theta)$.

Definičním oborem hledané funkce F je množina Ω .

$$\Omega = \{[\theta, \varphi] : \theta \in \langle 0, \pi \rangle, \varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle\}$$

Vhodnou ortogonální bázi $L_2(\Omega)$ tvoří sférické harmonické funkce (3.10). Připomeňme, že $L_2(\Omega)$ je vektorový prostor kvadraticky integrovatelných funkcí na množině Ω . Skalární součin v prostoru $L_2(\Omega)$ je definován jako integrál součinu funkcí $f, g \in L_2(\Omega)$ přes celou oblast Ω .

$$(f, g) = \int_{\Omega} f g \, d\Omega \quad \text{kde} \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.9)$$

Sférické harmoniky $F_n \in L_2(\Omega)$ jsou vzhledem k symetriím (2.11) tohoto tvaru:

$$F_n(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^n \sum_{m=0}^l (A_{l,m}^n \cos 2m\varphi + B_{l,m}^n \sin 2m\varphi) P_{2l}^{2m}(\cos \theta) \quad A_{l,m}^n, B_{l,m}^n \in \mathbb{R} \quad (3.10)$$

$$\text{Nultý člen } F_0(\theta, \varphi) = A_{0,0}^0$$

Pro skalární součin Legendrových polynomů platí:

$$\int_{\Omega} P_l^m P_k^m d\Omega = \delta_{k,l} \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \quad \text{kde } \delta_{k,l} \text{ je Kroneckerovo delta}$$

Několik prvních Legendrových polynomů:

$$P_0^0(\cos \theta) = 1, \quad P_2^0(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1), \quad P_2^2(\cos \theta) = 3 \sin^2 \theta$$

Všimněme si, že v normalizační podmínce (2.10) vystupuje stejný integrál, kterým je definován skalární součin. Dosadíme F ve tvaru řady do (2.10).

$$\int_{\Omega} F d\Omega = 1 \approx \int_{\Omega} \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^n F_n d\Omega = 1 \approx \int_{\Omega} F_0 d\Omega + \int_{\Omega} \sigma F_1 d\Omega + \int_{\Omega} \sigma^2 F_2 d\Omega + \dots = 1$$

Položíme-li všechny koeficienty $A_{0,0}^n = 0$ pro $n \geq 1$ potom platí:

$$\int_{\Omega} \sigma F_1 d\Omega + \int_{\Omega} \sigma^2 F_2 d\Omega + \dots = 0$$

Jinými slovy, zbavíme-li funkce F_1, F_2, \dots jejich konstantních členů, budou potom ortogonální k 1, což je bazová funkce $P_0^0(\cos \theta)$. Tedy skalární součin $(F_n, 1)$ je až na $(F_0, 1)$ vždy roven nule. Z toho plyne:

$$\int_{\Omega} F_0 d\Omega = 1 \approx \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} A_{0,0}^0 \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \Rightarrow F_0 = A_{0,0}^0 = \frac{1}{4\pi} \quad (3.11)$$

Získali jsme nultý člen řady (3.4). Pomocí rekurentních vztahů tedy můžeme dopočítat další členy.

3.2 Výpočet pro $\sigma < 1$

Uvažujme případ, kdy je Pecletovo číslo $\sigma < 1$. Pouze v tomto případě bude řada (3.4) konvergentní. σ je tedy poruchovým koeficientem. V této sekci uvedeme podrobný postup výpočtu jednotlivých členů řady pro $n = 1, 2, 3$. Nultý člen $F_0 = \frac{1}{4\pi}$.

Akce operátoru ∇^2 na sférické harmoniky je dána vztahem:

$$\nabla^2 F_n(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} -2l(2l+1) \sum_{m=0}^l (A_{l,m}^n \cos 2m\varphi + B_{l,m}^n \sin 2m\varphi) P_{2l}^{2m}(\cos \theta) \quad (3.12)$$

Pro $n = 1$ hledáme člen řady (3.4) ve tvaru:

$$F_1(\theta, \varphi) = A_{1,0}^1 P_2^0(\cos \theta) + (A_{1,1}^1 \cos 2\varphi + B_{1,1}^1 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta)$$

Dle rekurence (3.7) platí:

$$L\{F_0\} = \nabla^2 F_1$$

Dosazením za F_0 a F_1 v souladu s (3.5) a (3.12) dostaneme:

$$-\frac{1}{4\pi} \frac{b}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi = -6A_{1,0}^1 P_2^0(\cos \theta) - 6(A_{1,1}^1 \cos 2\varphi + B_{1,1}^1 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta)$$

Porovnáním koeficientů Legendrových polynomů na levé a pravé straně dostáváme:

$$-\frac{1}{4\pi} \frac{b}{2} P_2^2(\cos \theta) \sin 2\varphi = -6A_{1,0}^1 P_2^0(\cos \theta) - 6(A_{1,1}^1 \cos 2\varphi + B_{1,1}^1 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta)$$

$$\begin{aligned} P_2^0(\cos \theta) : \quad & 0 = -6A_{1,0}^1 \Rightarrow A_{1,0}^1 = 0 \\ \cos 2\varphi P_2^2(\cos \theta) : \quad & 0 = -6A_{1,1}^1 \Rightarrow A_{1,1}^1 = 0 \\ \sin 2\varphi P_2^2(\cos \theta) : \quad & -\frac{b}{8\pi} = -6B_{1,1}^1 \Rightarrow B_{1,1}^1 = \frac{b}{48\pi} \end{aligned}$$

Dostáváme další člen řady:

$$F_1(\theta, \varphi) = \frac{b}{48\pi} \sin 2\varphi P_2^2(\cos \theta) = \frac{b}{16\pi} \sin 2\varphi \sin^2 \theta \quad (3.13)$$

Pro $n = 2$ hledáme člen řady (3.4) ve tvaru:

$$\begin{aligned} F_2(\theta, \varphi) = & A_{1,0}^2 P_2^0(\cos \theta) + (A_{1,1}^2 \cos 2\varphi + B_{1,1}^2 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta) + A_{2,0}^2 P_4^0(\cos \theta) + \\ & + (A_{2,1}^2 \cos 2\varphi + B_{2,1}^2 \sin 2\varphi) P_4^2(\cos \theta) + (A_{2,2}^2 \cos 4\varphi + B_{2,2}^2 \sin 4\varphi) P_4^4(\cos \theta) \end{aligned}$$

Dle rekurence (3.7) platí:

$$L\{F_1\} = \nabla^2 F_2$$

Dosazením za F_1 a F_2 v souladu s (3.5) a (3.12) dostaneme:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{24} [b^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta (\sin 2\varphi)^2 - 6 \sin^2 \theta (1 + b \cos 2\varphi) b \cos 2\varphi + 9b^2 \sin^4 \theta (\sin 2\varphi)^2] = \\ = -6A_{1,0}^2 P_2^0(\cos \theta) - 6(A_{1,1}^2 \cos 2\varphi + B_{1,1}^2 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta) - 20A_{2,0}^2 P_4^0(\cos \theta) - \\ - 20(A_{2,1}^2 \cos 2\varphi + B_{2,1}^2 \sin 2\varphi) P_4^2(\cos \theta) - 20(A_{2,2}^2 \cos 4\varphi + B_{2,2}^2 \sin 4\varphi) P_4^4(\cos \theta) \end{aligned}$$

Porovnáním koeficientů Legendrových polynomů na levé a pravé straně dostáváme hledané koeficienty členu $F_2(\theta, \varphi)$.

$$A_{2,1}^2 = B_{1,1}^2 = B_{2,1}^2 = B_{2,2}^2 = 0$$

$$A_{1,0}^2 = -\frac{1}{16\pi} \frac{b^2}{21} \quad A_{1,1}^2 = -\frac{1}{16\pi} \frac{b^2}{18} \quad A_{2,0}^2 = \frac{1}{16\pi} \frac{b^2}{70} \quad A_{2,2}^2 = -\frac{1}{16\pi} \frac{b^2}{1680}$$

Dostáváme další člen řady:

$$F_2(\theta, \varphi) = \frac{1}{16\pi} \left[-\frac{b^2}{21} P_2^0(\cos \theta) + \frac{b^2}{70} P_4^0(\cos \theta) - \frac{b^2}{18} \cos 2\varphi P_2^2(\cos \theta) - \frac{b^2}{1680} \cos 4\varphi P_4^4(\cos \theta) \right]$$

$$F_2(\theta, \varphi) = \frac{1}{16\pi} \left[\frac{b^2}{16} \sin^4 \theta - \frac{b^2}{6} \cos 2\varphi \sin^2 \theta - \frac{b^2}{16} \cos 4\varphi \sin^4 \theta - \frac{b^2}{30} \right] \quad (3.14)$$

Pro $n = 3$ hledáme člen řady (3.4) ve tvaru:

$$F_3(\theta, \varphi) = A_{1,0}^3 P_2^0(\cos \theta) + (A_{1,1}^3 \cos 2\varphi + B_{1,1}^3 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta) + A_{2,0}^3 P_4^0(\cos \theta) +$$

$$+ (A_{2,1}^3 \cos 2\varphi + B_{2,1}^3 \sin 2\varphi) P_4^2(\cos \theta) + (A_{2,2}^3 \cos 4\varphi + B_{2,2}^3 \sin 4\varphi) P_4^4(\cos \theta) +$$

$$+ A_{3,0}^3 P_6^0(\cos \theta) + (A_{3,1}^3 \cos 2\varphi + B_{3,1}^3 \sin 2\varphi) P_6^2(\cos \theta) +$$

$$+ (A_{3,2}^3 \cos 4\varphi + B_{3,2}^3 \sin 4\varphi) P_6^4(\cos \theta) + (A_{3,3}^3 \cos 6\varphi + B_{3,3}^3 \sin 6\varphi) P_6^6(\cos \theta)$$

Dle rekurence (3.7) platí:

$$L\{F_2\} = \nabla^2 F_3$$

Dosazením za F_2 a F_3 v souladu s (3.5) a (3.12) dostaneme:

$$\frac{b^2}{32\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sin 2\varphi \left(\frac{b}{4} \sin^2 \theta - \frac{1}{3} \cos 2\varphi - \frac{b}{4} \sin^2 \theta \cos 4\varphi \right) +$$

$$+ \frac{1 + \cos 2\varphi}{32\pi} \left(\frac{b}{3} \sin^2 \theta \sin 2\varphi + \frac{b^2}{4} \sin^4 \theta \sin 4\varphi \right) -$$

$$- \frac{3b^2 \sin^2 \theta \sin 2\varphi}{32\pi} \left[\left(\frac{b}{16} \sin^4 \theta - \frac{b}{90} - \frac{1}{6} \sin^2 \theta \right) \cos 2\varphi - \frac{b}{16} \sin^4 \theta \cos 4\varphi \right] =$$

$$= -6A_{1,0}^3 P_2^0(\cos \theta) - 6(A_{1,1}^3 \cos 2\varphi + B_{1,1}^3 \sin 2\varphi) P_2^2(\cos \theta) - 20A_{2,0}^3 P_4^0(\cos \theta) -$$

$$- 20(A_{2,1}^3 \cos 2\varphi + B_{2,1}^3 \sin 2\varphi) P_4^2(\cos \theta) - 20(A_{2,2}^3 \cos 4\varphi + B_{2,2}^3 \sin 4\varphi) P_4^4(\cos \theta) -$$

$$- 42A_{3,0}^3 P_6^0(\cos \theta) - 42(A_{3,1}^3 \cos 2\varphi + B_{3,1}^3 \sin 2\varphi) P_6^2(\cos \theta) -$$

$$- 42(A_{3,2}^3 \cos 4\varphi + B_{3,2}^3 \sin 4\varphi) P_6^4(\cos \theta) - 42(A_{3,3}^3 \cos 6\varphi + B_{3,3}^3 \sin 6\varphi) P_6^6(\cos \theta)$$

Porovnáním koeficientů Legendrových polynomů na levé a pravé straně dostáváme hledané koeficienty členu $F_3^*(\theta, \varphi)$. Pro zjednodušení spočteme pouze koeficienty $\cos 2\varphi$ a $\sin 2\varphi$, koeficienty dalších trigonometrických funkcí považujeme za zanedbatelně malé.

Využijeme trigonometrické identity:

$$\begin{aligned}\cos 2\varphi \cos 4\varphi &= \frac{1}{2} \cos 6\varphi + \frac{1}{2} \cos 2\varphi & \sin 4\varphi \cos 2\varphi &= \frac{1}{2} \sin 6\varphi + \frac{1}{2} \sin 2\varphi \\ \sin 2\varphi \sin 4\varphi &= \frac{1}{2} \cos 2\varphi - \frac{1}{2} \cos 6\varphi & \sin 2\varphi \cos 4\varphi &= \frac{1}{2} \sin 6\varphi - \frac{1}{2} \sin 2\varphi\end{aligned}$$

Dostáváme:

$$\begin{aligned}A_{1,1}^3 &= A_{2,1}^3 = A_{3,1}^3 = 0 \\ B_{1,1}^3 &= -\frac{1}{16\pi} \frac{3b^3 + 35b}{3780} & B_{2,1}^3 &= -\frac{1}{16\pi} \frac{b^3}{4620} & B_{3,1}^3 &= \frac{1}{16\pi} \frac{b^3}{55440} \\ F_3^*(\theta, \varphi) &= \frac{1}{16\pi} \sin 2\varphi \left[-\frac{3b^3 + 35b}{3780} P_2^2(\cos \theta) - \frac{b^3}{4620} P_4^2(\cos \theta) + \frac{b^3}{55440} P_6^2(\cos \theta) \right] \\ F_3^*(\theta, \varphi) &= \frac{1}{16\pi} \sin 2\varphi \left[-\frac{3b^3 + 35b}{1260} \sin^2 \theta - \frac{b^3}{616} (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta + \right. \\ &\quad \left. + \frac{b^3}{4224} \sin^2 \theta (33 \sin^4 \theta - 48 \sin^2 \theta + 16) \right] \quad (3.15)\end{aligned}$$

Výsledné přibližné řešení rovnice (3.3) je suma:

$$\begin{aligned}F &\sim \sum_{n=0}^3 \sigma^n F_n(\theta, \varphi) = F_0 + \sigma F_1 + \sigma^2 F_2 + \sigma^3 F_3^* \\ F &= \frac{1}{4\pi} + \sigma \frac{b}{16\pi} \sin 2\varphi \sin^2 \theta + \\ &\quad + \sigma^2 \frac{1}{16\pi} \left[\frac{b^2}{16} \sin^4 \theta - \frac{b^2}{6} \cos 2\varphi \sin^2 \theta - \frac{b^2}{16} \cos 4\varphi \sin^4 \theta - \frac{b^2}{30} \right] + \\ &\quad + \sigma^3 \frac{1}{16\pi} \sin 2\varphi \left[-\frac{3b^3 + 35b}{1260} \sin^2 \theta - \frac{b^3}{616} (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta + \right. \\ &\quad \left. + \frac{b^3}{4224} \sin^2 \theta (33 \sin^4 \theta - 48 \sin^2 \theta + 16) \right] + \mathcal{O}(\sigma^4) \quad (3.16)\end{aligned}$$

3.3 Výpočet pro $\sigma > 1$

Dále musíme zvážit případ kdy je Pecletovo číslo $\sigma > 1$. V tomto případě by řada (3.4) nekonvergovala. Je nutné zvolit jiný poruchový koeficient, který bude menší než 1. Zvolíme geometrický parametr b (1.3) a vytkneme ho před levou stranu diferenciální rovnice. Vezměme Fokker-Planckovu rovnici (3.3) a provedme úpravu.

$$\begin{aligned} \frac{qb}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{q}{2}(1 + b \cos 2\varphi) \frac{\partial F}{\partial \varphi} - \frac{qb}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi F &= D \nabla^2 F \\ qb \left(\frac{1}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cos 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi F \right) &= -\frac{q}{2} \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \frac{q}{\sigma} \nabla^2 F \quad / \cdot \frac{1}{q} \\ b \left(\frac{1}{4} \sin 2\theta \sin 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cos 2\varphi \frac{\partial F}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} 3 \sin^2 \theta \sin 2\varphi F \right) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 F \end{aligned}$$

Levou stranu rovnice definujeme jako diferenciální operátor L . Poruchovou řadu uvažujeme v tomto tvaru:

$$F = \sum_{n=0}^{\infty} b^n F_n(\theta, \varphi) \quad (3.17)$$

Dosazením řady do rovnice dostaneme:

$$\begin{aligned} bL \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} b^n F_n \right\} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \sum_{n=0}^{\infty} b^n F_n + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} b^n F_n \right\} \\ bL\{F_0\} + b^2 L\{F_1\} + b^3 L\{F_2\} + \dots &= -\frac{1}{2} \frac{\partial F_0}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 F_0 - \frac{b}{2} \frac{\partial F_1}{\partial \varphi} + \frac{b}{\sigma} \nabla^2 F_1 - \frac{b^2}{2} \frac{\partial F_2}{\partial \varphi} + \frac{b^2}{\sigma} \nabla^2 F_2 + \dots \\ b^0 : \quad 0 &= -\frac{1}{2} \frac{\partial F_0}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 F_0 \\ b^1 : \quad L\{F_0\} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial F_1}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 F_1 \\ b^2 : \quad L\{F_1\} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial F_2}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 F_2 \end{aligned}$$

Získali jsme rekurentní relaci:

$$L\{F_{n-1}\} = -\frac{1}{2} \frac{\partial F_n}{\partial \varphi} + \frac{1}{\sigma} \nabla^2 F_n \quad (3.18)$$

Stejně jako v případě pro $\sigma < 1$ jsou funkce F_n sférické harmoniky ve tvaru (3.9). Nultý člen je nezávislý na výběru poruchového koeficientu, tedy opět klademe $F_0 = \frac{1}{4\pi}$. Následující výpočet je zcela analogický, proto uvedeme pouze výsledek pro $n = 2$.

$$\begin{aligned} F &\sim \sum_{n=0}^2 b^n F_n(\theta, \varphi) = F_0 + bF_1 + b^2 F_2 \\ F &= \frac{1}{4\pi} + b \frac{3\sigma^2}{4\pi(\sigma^2 + 36)} \left(-\frac{1}{2} \cos 2\varphi + \frac{3}{\sigma} \sin 2\varphi \right) \sin^2 \theta + b^2 \frac{\sigma^2}{4\pi(\sigma^2 + 36)} \left[\frac{9}{16} \cos^4 \theta - \right. \\ &\quad \left. - \frac{39}{56} \cos^2 \theta + \frac{147}{560} + \frac{15\sigma \sin^4 \theta}{\sigma^2 + 100} \left(\frac{16\sigma^2 - 960}{\sigma} \cos 4\varphi - \sin 4\varphi \right) \right] + \mathcal{O}(b^3) \end{aligned} \quad (3.19)$$

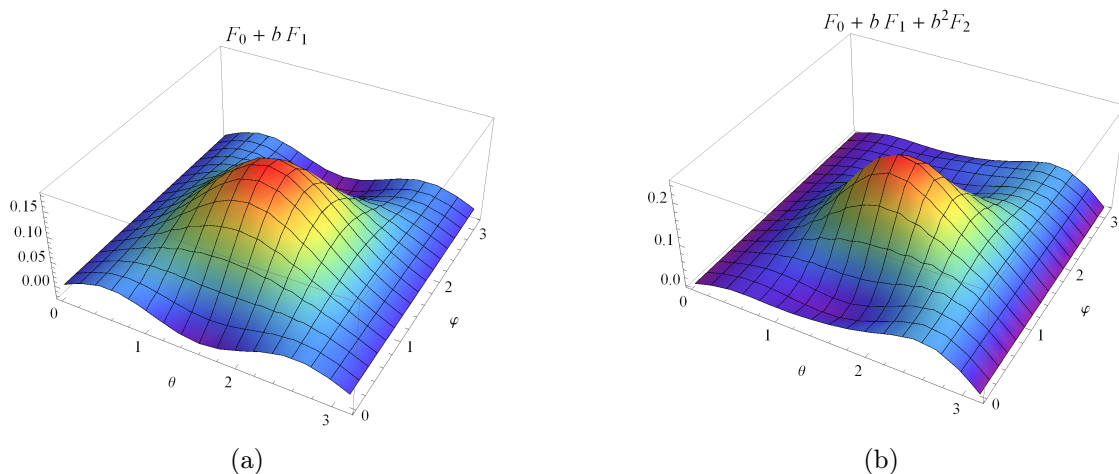
Kapitola 4

Interpretace výsledků

V této kapitole shrneme významné vlastnosti stacionárního řešení Fokker-Planckovy rovnice, které jsme obdrželi v předchozí kapitole. Nalezená funkce F je spojitě rozdělení pravděpodobnosti úhlové distribuce. V anglické literatuře se často setkáme s názvem "orientation distribution function", z čehož bychom mohli mylně usoudit, že se jedná o distribuční funkci. F je ve skutečnosti hustota rozdělení pravděpodobnosti, nikoliv jeho distribuční funkce. Pro úplnou korektnost definujme Eulerovy úhly θ, φ jako náhodné veličiny, F je hustotou pravděpodobnosti spojitěho náhodného vektoru $[\theta, \varphi]$.

4.1 Řešení pro $\sigma > 1$

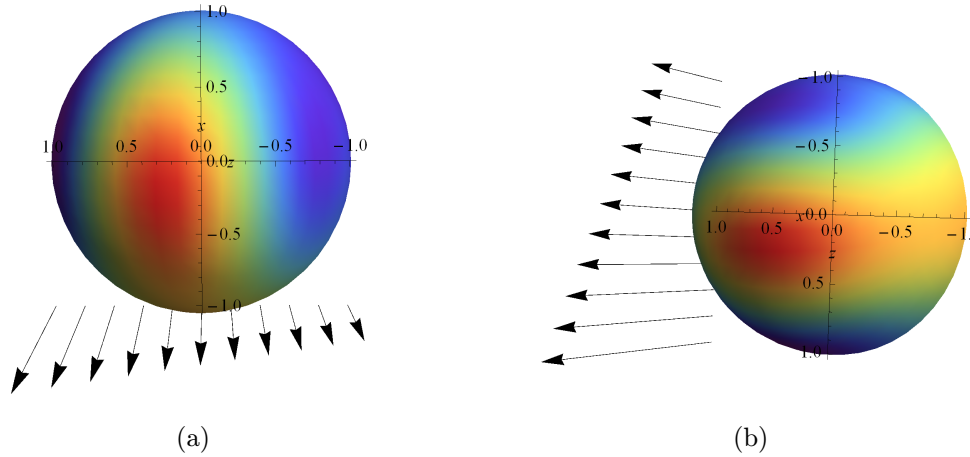
Vysoká hodnota Pecletova čísla σ znamená převahu advekčních sil nad silami difuzními, což je typické pro laminární proudění. Porovnejme graficky aproximace F pro $n = 1, 2$ na obrázku 4.1. Znázorněná funkce je vypočtena pro částici tvaru rotačního elipsoidu s poměrem poloos 5 : 1, to odpovídá geometrickému parametru $b = 0.923$. Proudění je laminární s Pecletovým číslem $\sigma = 15$.



Obrázek 4.1: (a) F pro $n = 1$ (b) F pro $n = 2$

Z obrázku je vidět, že mezi aproximací prvního a druhého řádu je patrný rozdíl. Aproximace třetího řádu se od druhého řádu liší už jen nepatrně, proto zde její graf neuvádíme. Výsledek (3.19) souhlasí s Peterlinovým [3] řešením F pro vysoké Pecletovo číslo. Grafy byly vytvořeny v prostředí Wolfram Mathematica.

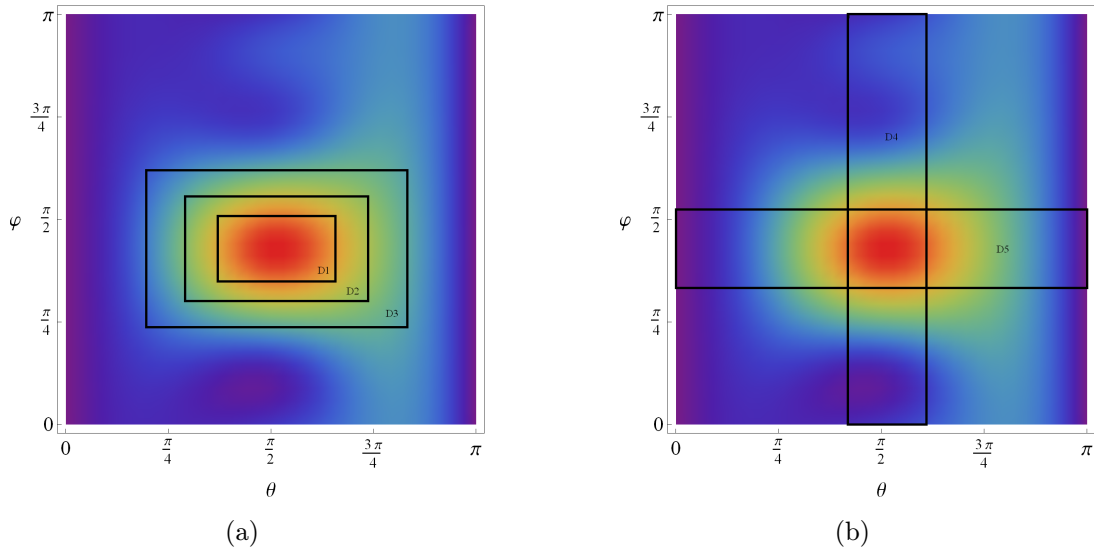
V dalším graficky znázorníme hustotu F (3.19). Sférické znázornění lze chápat jako pohled do potrubí ve směru proudění kapaliny. Úsečka spojující počátek souřadného systému a červeně znázorněné maximum představuje částici ve své nejpravděpodobnější orientaci.



Obrázek 4.2: (a) Sférické znázornění, přední a boční pohled

V tomto případě je úhel φ azimutální, tedy leží v rovině rychlostního gradientu. Úhel θ je úhel longitudální, při $\varphi = 90^\circ$ leží v rovině kolmé na rovinu rychlostního gradientu. Středem našeho zájmu bude zřejmě maximum funkce:

$$[\theta_{max}, \varphi_{max}] \doteq [1.61472, 1.34646]\text{rad} \approx [92.5^\circ, 77.2^\circ]$$



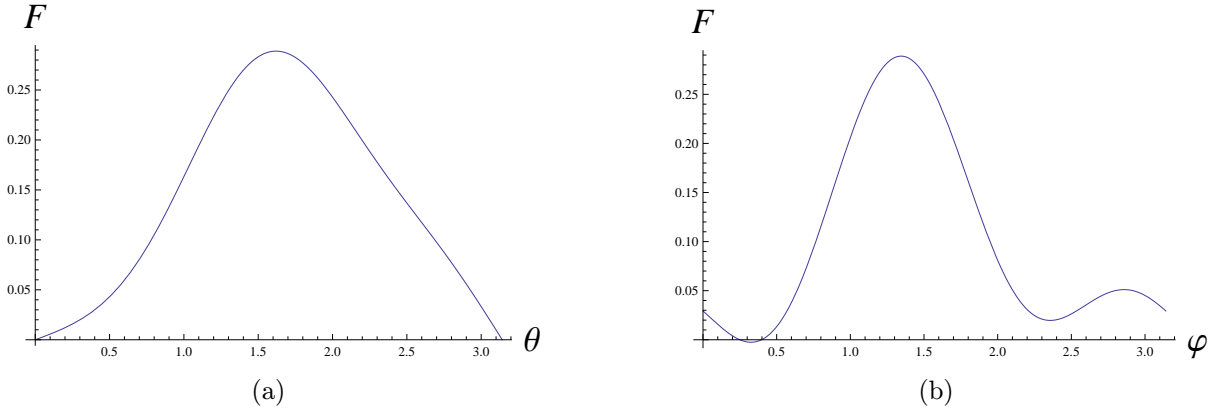
Obrázek 4.3: (a) Oblasti s nejvyšší pravděpodobností (b) Šířka obou pásů je $0.6 \text{ rad} \approx 34^\circ$

Na obrázku 4.3 je zobrazen graf hustoty z pohledu shora. Znázorněné oblasti představují úhlová rozmezí symetrická kolem maxima. Pravděpodobnost příslušící orientaci částice v úhlovém rozmezí dané oblasti D je vypočtena jako integrál z $F(\theta, \varphi)$ přes danou oblast. Integrál přes celý definiční obor F klademe roven 1, což logicky odpovídá pravděpodobnosti 100%.

Výpočet pravděpodobností pro jednotlivé oblasti:

$$\begin{aligned}
P([\theta, \varphi] \in D1) &= \int_{D1} F d\Omega = \int_{D1} F \sin \theta d\theta d\varphi = 0.0974882 \doteq 9.7\% \\
P([\theta, \varphi] \in D2) &= \int_{D2} F d\Omega = \int_{D2} F \sin \theta d\theta d\varphi = 0.210553 \doteq 21.1\% \\
P([\theta, \varphi] \in D3) &= \int_{D3} F d\Omega = \int_{D3} F \sin \theta d\theta d\varphi = 0.340467 \doteq 34.1\% \\
P([\theta, \varphi] \in D4) &= \int_{D4} F d\Omega = \int_{D4} F \sin \theta d\theta d\varphi = 0.178646 \doteq 17.9\% \\
P([\theta, \varphi] \in D5) &= \int_{D5} F d\Omega = \int_{D5} F \sin \theta d\theta d\varphi = 0.222987 \doteq 22.3\% \quad (4.1)
\end{aligned}$$

Za účelem názorněji interpretovat funkci F jsme provedli řezy jejího prostorového grafu procházející maximem funkce. Získáváme tedy dva grafy.



Obrázek 4.4: (a) $F(\theta), \varphi = \varphi_{max}$ (b) $F(\varphi), \theta = \theta_{max}$

Vidíme, že longitudální úhel θ má téměř normální rozdělení pravděpodobnosti se střední hodnotou 92° . Azimutální úhel φ , který leží ve stejné rovině jako rychlostní gradient, má již složitější průběh.

4.2 Řešení pro $\sigma < 1$

Řešení Fokker-Planckovy rovnice jsme obdrželi i pro případ, kdy je Pecletovo číslo $\sigma < 1$, což je charakteristické pro turbulentní proudění. Aby toto řešení ale bylo skutečně platné pro turbulentní proudění, museli bychom vycházet z časově středovaných Reynoldsových rovnic pro pohyb tekutiny. Tento přístup je značně komplikovaný a přesahuje rámec této práce. Řešení F (3.16) je tedy platným řešením rovnice (3.3), ale již nemodeluje reálnou situaci dostatečně přesně. Napovídají tomu velmi malé číselné koeficienty trigonometrických funkcí, které činí výslednou funkci téměř konstantní.

Závěr

Cílem tohoto textu bylo poskytnout srozumitelný úvod do problematiky úhlové distribuce a ukázat matematický postup řešení. Odvodili jsme Fokker-Planckovu rovnici pro distribuci úhlové orientace mikroskopických částic. Tento model zohledňuje vliv gradientu rychlosti a vliv Brownova pohybu molekul kapaliny. Tento model lze aplikovat na proudění s lineárním nebo parabolickým rychlostním profilem. Jedná se o stacionární problém. Řešení pro nestacionární variantu nebo pro turbulentní proudění jsou dohledatelné v užití literatuře.

Za užití teorie poruchových řad jsme našli přibližné řešení stacionární Fokker-Planckovy rovnice ve tvaru semi-analytické funkční řady. Výpočet jsme provedli pro malé i velké hodnoty Pecletova čísla, přičemž pouze varianta pro vysoké Pecletovo číslo je v praxi použitelná, a to například pro výpočet účinnosti depozice vláken na stěně trubice.

Pozornost si zaslouží samotná metoda poruchové řady, neboť se jedná o velmi silný a levný výpočetní aparát zároveň. Poskytuje libovolně přesnou aproximaci řešení eliptické PDR, a to bez použití jakýchkoliv moderních numerických metod. Pro výpočet numerických koeficientů ortogonálních funkcí lze odvodit rekurentní relaci, která je uvedena v [3]. Ačkoliv se dle některých zdrojů jedná o překonanou metodu, v některých aplikacích je stále hojně využívána.

Literatura

- [1] JEFFERY, G. B. The Motion of Ellipsoidal Particles Immersed in a Viscous Fluid. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1922-11-01, vol. 102, issue 715, s. 161-179. DOI: 10.1098/rspa.1922.0078.
- [2] KRUSHKAL, E.M a Isaiah GALLILY. On the orientation distribution function of nonspherical aerosol particles in a general shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*.1984, vol. 99, issue 1, s. 141-152. DOI: 10.1016/0021-9797(84)90094-8.
- [3] PETERLIN, A. Über die Viskosität von verdünnten Lösungen u. Suspensionen in Abhängigkeit von der Teilchenform. *Z. Phys*.1938, s. 232-263.
- [4] BERNSTEIN, Odette. Direct determination of the orientation distribution function of cylindrical particles immersed in laminar and turbulent shear flows. *Journal of Aerosol Science*.1991, vol. 22, S141-S144. DOI: 10.1016/S0021-8502(05)80054-0. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021850205800540>.
- [5] ARGYROPOULOS, G.S. Anisotropies and Interactions in Shear Flow of Macromolecular Suspensions. *California Institute of Technology: CIT theses*.1965. Dostupné z: http://thesis.library.caltech.edu/97/1/Argyropoulos_gs_1965.pdf.